

# 3 次元 Lebwohl-Lasher モデル における相転移の研究

量子凝縮系研究室修士 2 年

13879324 高松幹人

# 目次

## 1 章 序章 p.2

### 1.1 はじめに p.2

### 1.2 目的

### 1.3 相転移、1 次転移と二次転移

### 1.4 Ising モデル

### 1.5 液晶の isotropic 相転移、Lebwohl-Lasher モデル p.3

## 2 章 計算手法 p.4

### 2.1 メトロポリス法(モンテカルロシミュレーション) p.4

### 2.2 Wang-Landau 法 p.6

### 2.3 1 次転移の判定 p.8

### 2.4 有限サイズスケーリング p.10

## 3 章 結果 p.12

### 3.1 2D Ising モデルにおける結果 p.12

### 3.2 3DLL モデルにおける結果 p.17

## 4 章 終章 p.26

### 4.1 まとめ

### 4.2 今後の展望

### 4.3 参考文献

### 4.4 謝辞 p.27

# 1 章 序章

## 1.1 はじめに

我々の身のまわりの物質は、多くの原子核と電子からできているが、粒子間の相互作用のために、個々の粒子からは予想のつかない多様な性質を示す。多体問題における代表的な問題である相転移現象について、計算的手法でアプローチを行う。主な手法としてはモンテカルロシミュレーションであるメトロポリス法や拡張アンサンブルである Wang-Landau 法[1]を用いてシミュレーションを行う。簡単なモデルである 2D イジングモデルをプログラムのテストも兼ねて扱い、Nematic-Isotropic 転移を起こす 3D Lebwohl-Lasher(3DLL)モデル[2]へと拡張をした。

## 1.2 目的

2D イジングモデルにおいて、2つの手法を用いて熱物理学量を計算する。また有限サイズスケリングを行い2次転移を証明する。3DLL において、メトロポリス法により熱物理量を計算する。Wang-Landau 法による状態密度の差分の計算をし、1次転移を証明する。

## 1.3 相転移、1次転移と2次転移

相転移とはある系の相が別の相へと変わることを示す。熱力学量の特異性の度合いによって分類される。自由エネルギーの1次微分に不連続性があるときに1次転移といい、2次以上の微分に不連続性ないし発散があれば2次転移と呼ぶ。例えば氷が水になる時のように潜熱を伴う転移はエントロピー $S = -(\partial F / \partial T)_V$ が不連続に変化するため1次転移である。エントロピーは連続であるが、その温度微分である比熱 $C_V = T(\partial S / \partial T)_V = -T(\partial^2 S / \partial T^2)_V$ に飛びがある場合は2次転移である。今回扱うイジングモデルは2次転移を起こすとされている。3DLL モデルは相転移を示しているが[3-4], 1次であるか、2次転移であるか議論されている。[5]

系の状態密度の変化分(温度の逆数にあたるもの)のエネルギー依存性をプロットすると、1次転移を示す時、S字構造が見られる。このことによって1次転移を判定することができる。S字構造の部分にマクスウェルの等面積則を適用すると、転移点が分かり転移温度を特定することができる。

## 1.4 Ising モデル

Ising(イジング)モデルは相転移を示す簡単な磁性体のモデルで非常によく知られている。各格子点のスピンは+1,-1の2通りのみとり、最近接格子間の相互作用を考えるとそのハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

である。本研究で扱う 2 次元正方格子の場合には、1 粒子あたりに着目すると、最近接格子点は 4 点あるのでとりうるエネルギーは  $-4J$  から  $4J$  となる。N 粒子のとりうるエネルギーはダブルカウントを考慮し 2 で割って  $-2NJ$  から  $2NJ$  となる。システムサイズ  $L \times L$  のエネルギーは全ての粒子についてのエネルギーの和となりとりうるエネルギーは  $-2L^2J$  から  $2L^2J$  となる。

### 1.5 液晶の nematic-isotropic 転移、Lebwohl-Lasher モデル

棒状分子からなる液晶は、nematic-isotropic 転移(NI 転移)を示す。NI 転移とは nematic 相と isotropic 相の二つの相を持つ転移である。nematic 相は、棒状分子の長軸が一定方向にそろうのに対して、isotropic 相では無秩序の方向、つまりばらばらの方向をとる。

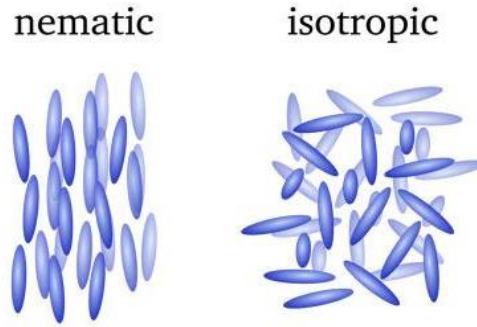


図 1.5.1 nematic,isotropic 概念図([www.theiet.org](http://www.theiet.org))

この NI 転移を解析するモデルとして、3 次元 Lebwohl-Lasher model (3DLL モデル)をとる。LL モデルは、方位づけられた秩序無秩序転移を持つ回転子の格子モデルであり、ネマティック液晶の Maier-Saupe 平均場モデルの格子バージョンである。単純立方格子上の単軸回転子を考え、対のポテンシャルは次式(1)で与えられるとする。

$$\Phi_{ij} = -\epsilon P_2(\cos \beta_{ij}) \quad (1)$$

ここで  $\epsilon > 0$  は相互作用定数であり、 $\beta_{ij}$  は最近接格子点  $i$  と  $j$  の間の角度差である。そして  $P_2$  は 2 次のルジャンドルの多項式である。

すると、このモデルのハミルトニアンは次の(2)式で表される。

$$H = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{3}{2} (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j)^2 - \frac{1}{2} \right\} \quad (2)$$

ここで、和は全ての最近接格子点間についてとる。棒状分子はスピンとは異なり、方向性を持たない。つまり磁性体モデルと違い、上向きスピンと下向きスピンの区別がないということである。また相互作用は長軸の角度差にのみ依存する。なお、取り得るエネルギーは  $-3\varepsilon N \sim +3/2\varepsilon N$  である。

この系の秩序相を記述する、orientational order のオーダーパラメータ・テンソルは次の(3)式で表される。

$$S_{\alpha\beta}(r) = \frac{1}{N} \sum_i \left( u_{\alpha}^{(i)} u_{\beta}^{(i)} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \quad (3)$$

$\alpha, \beta = (x, y, z)$

このテンソルの最大固有値の  $3/2$  倍をオーダーパラメータ(秩序変数)とする。

## 2 章 計算手法

### 2.1 メトロポリス法(モンテカルロシミュレーション)

本研究では計算手法の一つとしてモンテカルロシミュレーションを用いた。モンテカルロシミュレーションとは乱数の種をもとに計算をパソコン上に仮想的に実現する方法であり、本研究ではシングルスピンフリップによるカノニカル分布を作り出すメトロポリス法を用いた。

統計力学的なモデルにおいて、熱力学量はカノニカル分布における平均として次式で与えられる。

$$\langle A \rangle = \frac{\sum A \exp(-\beta H)}{\sum \exp(-\beta H)} \quad (1)$$

ここでいう  $H$  はハミルトニアンで、Ising モデルでは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (S_i = \pm 1) \quad (2)$$

3DLL モデルでは

$$H = - \epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{3}{2} (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j)^2 - \frac{1}{2} \right\} \quad (2)'$$

である。また温度の単位はイジングモデルでは  $T(J/k_B)$ 、3DLL モデルでは  $T(\epsilon/k_B)$  として、比熱はエネルギーの分散として計算を行った。

本来の統計力学的手法では(1)式の和は全ての取り得る状態に関する和であるが、モンテカルロ法では、重みつきサンプリングという方法で効率よく計算される。もしも状態  $i$  を確率  $\exp(-\beta H_i)$  で逐次出現させることができたとすれば、 $n$  番目の状態を  $i(n)$  として、トータル  $N$  個の状態をサンプリングしたときの熱力学量の計算は

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N A_{i(n)}}{N} \quad (3)$$

と単純平均であらわすことができる。この方法を重みつきサンプリングという。状態  $i$  を確率  $p = \exp(-\beta H_i)$  で出現させるようなアンサンブルを作るための方法として、マスター方程式を満たすマルコフ連鎖を用いるメトロポリス法がある。この計算を行うための必要条件とし①詳細釣り合い②エルゴード性の 2 つの条件が必要であり、この条件を満たした上で(3)式を計算するのがメトロポリス法である。

①  $W_{ij}$  を状態  $i$  から  $j$  への遷移確率として、

$$p(i)W_{ij} = p(j)W_{ji} \quad (4)$$

という式で与えられる条件である。

② 任意の 2 つの状態間を有限ステップ内に到達可能であり、かつその到達ステップに周期性がないという条件である。

モンテカルロ法の手法としてシングルスピンフリップによるカノニカル分布を確率過程で実現する、メトロポリス法という数値手法がある。メトロポリス法とは何かを記述する。確率  $p(i) = \exp(-\beta H_i)$  で状態を出現させるためのアルゴリズムとして、マルコフ過程というものを考える。マルコフ過程とは、状態の選び方に関するルールであり、重要なのは状態を変える際に必要な情報が変える前の状態のみを必要とするという点である。つまり、以前に通ってきた状態には依存せず、唯一今ある状態だけが関係する、ということである。言い換えると、前の状態に依存した確率分布で新しい状態を生成させる。マルコフ過程から生まれた状態の連続をマルコフ連鎖という。このマルコフ連鎖を使ってシミュレーションを行うアルゴリズムの中で最も重要かつ、頻繁に使われるのがこのメトロポリス法である。

1.4(4)式を次のように変形する。

$$\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{p(j)}{p(i)} = \exp(-\beta(E_j - E_i)) \quad (5)$$

$W_{ij}$ は遷移確率を表していて、 $W_{ij} = \exp(-\beta E)$ である。この関係を満たす具体的な遷移確率

$$\begin{aligned} \text{として } W_{ij} &= \exp(-\beta(E_j - E_i)) \quad (E_j > E_i) \\ &= 1 \quad (E_j \leq E_i) \end{aligned} \quad (6)$$

が挙げられる。

この $W_{ij}$ がメトロポリス法の遷移確率となる。新しく提案されたスピン配置  $j$  のエネルギー

$E_j$ がもとのスピン配置  $i$  のエネルギー $E_i$ よりも高い場合は確率 $\exp(-\beta(E_j - E_i))$ でスピンの

$i$  から  $j$  へと移り、低い場合は 1 の確率でつまり必ず  $j$  に移る。実際のシミュレーションでは温度を与え、1つのスピンを選択し、そのスピンのフリップを上記の遷移確率を用いて計算し、熱平均を計算する。このフリップの判定の回数を測定回数として計算している。メトロポリス法では、相転移点近傍で緩和が遅くなるという問題点がある。この遅いダイナミックスの問題を解決する拡張アンサンブル法として、後に記述する Wang-Landau 法[1]がある。

## 2.2 Wang-Landau 法

Wang-Landau 法とはエネルギー状態密度を直接求める拡張アンサンブルの 1 つである。初期値として適当に与えた状態密度を出発点に、エネルギー空間をランダムウォークさせることによって、反復法により状態密度を更新させていく方法である。

Wang-Landau 法とは次のような手順で計算している。

遷移確率を

$$\begin{aligned} W(S_1 \rightarrow S_2) &= g(E_1)/g(E_2) \quad g(E_2) > g(E_1) \\ W(S_1 \rightarrow S_2) &= 1 \quad g(E_2) \leq g(E_1) \end{aligned}$$

として、この状態密度  $g(E)$  を更新していく手法である。これは遷移確率をランダムにする  
とヒストグラムは状態密度に比例した形になってしまうのでフラットにするために状態密度  
が大きいほど別の状態に移りやすいように遷移確率を決めている。

詳しい手順は次のようである。

- (1) 取りうるエネルギーの状態密度とヒストグラムの初期値をそれぞれ  $g(E)=1, H(E)=0$  ( $E$ ;取りうるすべてのエネルギー)とする。

- (2) 1つのスピンをフリップさせ、変化前と変化後のエネルギーをそれぞれ $E_1, E_2$ とする。  
 (3) スピンが遷移する確率を以下のように定義する。

$$W(E_1 \rightarrow E_2) = \min[1, g(E_1)/g(E_2)]$$

- (4)(3)を行った後のエネルギー $E$ に対し、エネルギー状態密度とヒストグラムを次のように更新する。

$$g(E) \rightarrow g(E)f \quad (f > 1)$$

$$H(E) \rightarrow H(E) + 1$$

- (5)取り得るすべてのエネルギーのヒストグラムがヒストグラムの平均値の80%以上になるまで繰り返す。  
 (6)(5)の条件をクリアしたら、 $f \rightarrow \sqrt{f}$ と変換して(2)に戻る。

以上の操作を  $f < \exp(10^{-8})$  になるまで繰り返し、最終的に出てきた  $g(E)$  の値がその系におけるエネルギー状態密度となる。釣り合いの条件はフラットなヒストグラムが形成される、つまりどの状態密度にも訪れる回数が等しくなることである。(1)~(6)までの一連の流れの繰り返しの回数を **iteration** の回数  $i$  としている。 $i$  が大きくなれば正確な収束のよいデータとなる。**Wang-Landau** 法の利点としては、エネルギー状態密度が求められるため次のように全温度領域の物理量が一度に計算できる。

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\sum_i E_i \exp(-\beta E_i)}{\sum_i \exp(-\beta E_i)} = \frac{\sum_E E g(E) \exp(-\beta E)}{\sum_E g(E) \exp(-\beta E)} \\ C &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \\ &= \frac{\left\{ \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{kT}} \cdot \left( \sum_E E g(E) e^{-\frac{E}{kT}} \right)' - \left( \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{kT}} \right)' \cdot \sum_E E g(E) e^{-\frac{E}{kT}} \right\}}{\left\{ \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{kT}} \right\}^2} \\ &= \frac{1}{kT^2} \left( \frac{1}{Z} \sum_E E^2 e^{-\frac{E}{kT}} \right) - \frac{1}{kT^2} \left( \frac{1}{Z} \sum_E E e^{-\frac{E}{kT}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \end{aligned}$$



## 2.3 1 次転移の判定

状態密度の差分、 $\Delta \ln g(E)$

$$\Delta \ln g(E) = \ln g(E + \Delta E) - \ln g(E)$$

は相転移の次数の判定に役立つ。例えば、典型的な 1 次転移を示すことが知られている 2 次元 10 状態ポッツモデルの場合の  $\Delta \ln g(E)$  のエネルギー依存性を図 2.3.1 に示すが、このプロットが S 字型構造を示すことがわかる。これは、図 2.3.2 に示すような熱力学における Maxwell の規則に対応していて、等面積となる縦軸が 1 次転移点  $\beta_c (=1/T_c)$  を与える。

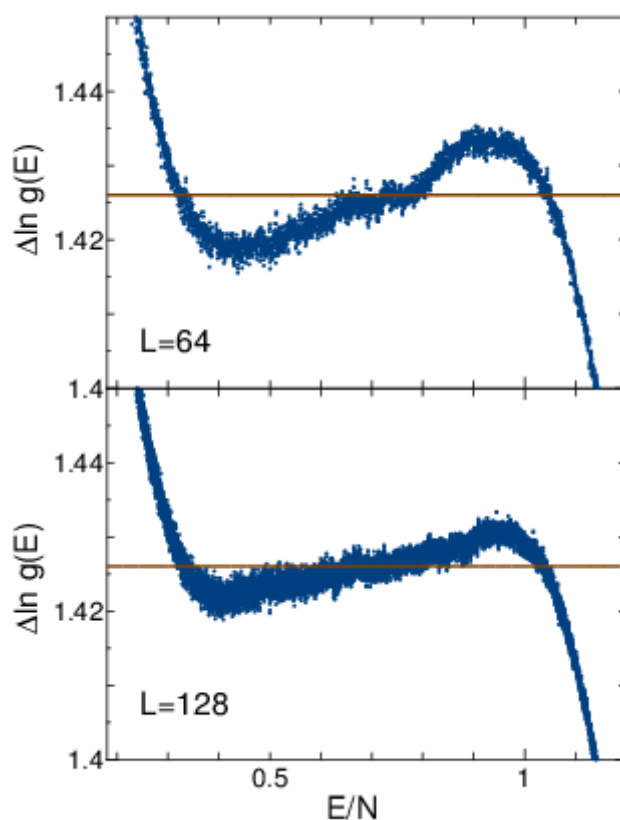


図 2.3.1 2 次元 10 状態ポッツモデルの  $\Delta \ln g(E)$  のエネルギー依存性 [7]

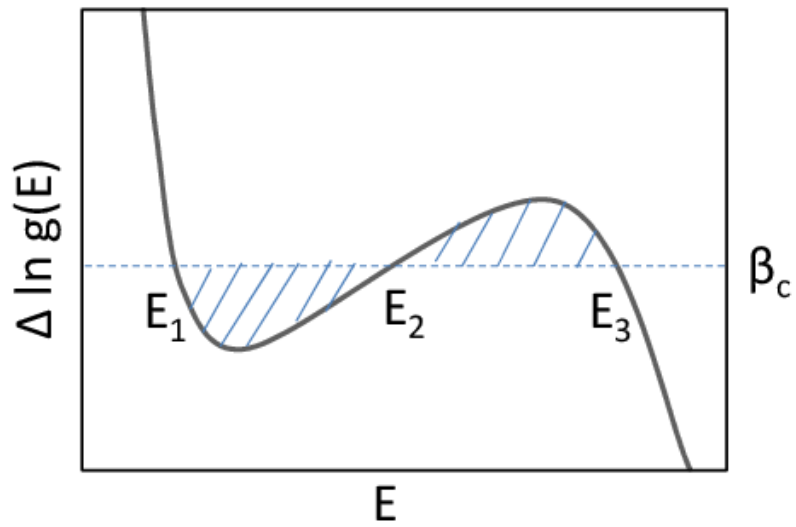


図 2.3.2 Maxwell の等面積則の説明 [7]

また 2 次転移を示すイジングモデルのような系では  $\Delta \ln g(E)$  はなだらかに減少していくので、S 字構造は見られない平坦なグラフとなる。その例が図 2.3.3 である。

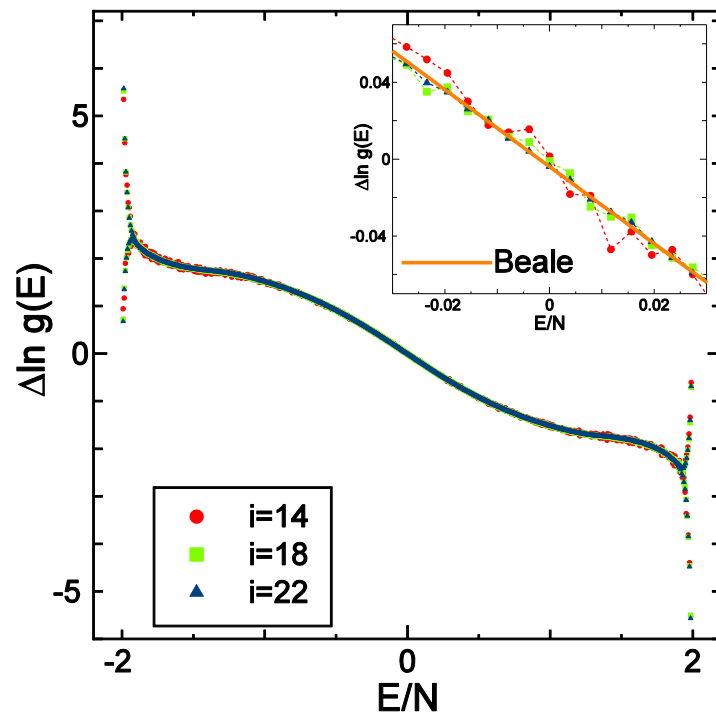


図 2.3.3 イジングモデルにおける  $\Delta \ln g(E)$  のエネルギー依存性[7]

本研究では 3DLL モデルの 1 次転移の証明を行うが、同モデルにおいてメトロポリス法による 1 次転移の証明は先行の研究で行われているが Wang-Landau 法による証明はあまり行われていない。そこで Wang-Landau 法による計算を行う。1 次転移の判定には Komura-Okabe[7]により提案された方法を用いる。それは、もし 1 次転移が存在するならば横軸をエネルギー  $E$ 、縦軸を  $\Delta \ln g(E)$  としてグラフをプロットした場合、 $\beta = \beta_c$  上でグラフが S 字構造の形になることが知られている。ここで  $\beta$  は温度の逆数であり、 $\beta_c$  は 1 次転移上の温度の逆数である。またこのグラフにマクスウェルの等面積則を適用することによって、 $\beta_c$  を特定することができる。

## 2.4 有限サイズスケーリング

シミュレーションは有限系で実行し、転移点における特異的な振舞いが抑えられるので、無限系の性質である相転移を調べられないのではないかと思うかもしれないが、そうではなく、物理量のサイズ効果を系統的に調べることによって、相転移の性質を定量的に精度よく研究することが可能となる。そこで有限サイズスケーリングという概念を用いる。

有限系を取り扱うにあたって、有限サイズ効果を考えなければならない。有限サイズ効果は相関長  $\xi$  とサイズ  $L$  の比で与えられることが分かっている。それを具体的に書くと次の式ようになる。

$$\frac{L}{\xi} \propto \frac{L}{(T - T_c)^{-\nu}} \approx ((T - T_c)L^{1/\nu})^\nu \quad (7)$$

それをもとにして、ある物理量の臨界点付近での振舞いとして期待される関数形を求めることが可能である。この理論を有限サイズスケーリングの理論という。

例として  $\langle m^2 \rangle$  の有限サイズスケーリングを示す

$$\langle m^2 \rangle = (T_c - T)^{2\beta} \approx (L^{1/\nu})^\nu \quad (8)$$

(8)式に(7)式の有限サイズを考慮して

$$\langle m^2 \rangle \approx (T_c - T)^{2\beta} g((T - T_c)L^{1/\nu}) \quad (9)$$

となり、さらに計算すると、

$$\begin{aligned} \langle m^2 \rangle &\approx \left\{ (T_c - T)L^{1/\nu} \right\}^{2\beta} \times L^{-2\beta/\nu} g((T - T_c)L^{1/\nu}) \\ &= L^{-2\beta/\nu} f((T - T_c)L^{1/\nu}) \end{aligned} \quad (10)$$

となり、 $\langle m^2 \rangle$  の臨界点付近での振舞いを表す関数形がもとまった。

磁化の 2 乗平均, 4 乗平均は(10)式を用いると、それぞれ  $t = T - T_c$  として

$$\langle m^2(L) \rangle \approx L^{-\frac{2\beta}{\nu}} f_1 \left( tL^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

$$\langle m^4(L) \rangle \approx L^{-\frac{2\beta}{\nu}} f_2 \left( tL^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

と表すことができる。ここで

$$\frac{\langle m^4(L) \rangle}{\langle m^2(L) \rangle} \approx \frac{f_2 \left( tL^{\frac{1}{\nu}} \right)}{\left\{ f_1 \left( tL^{\frac{1}{\nu}} \right) \right\}^2} = g \left( tL^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

となって、係数部分がキャンセルし、 $t=0$  の場合  $L$  に依存しなくなる。このときの  $g \left( tL^{\frac{1}{\nu}} \right)$  が binder 比であり、横軸温度、縦軸 binder 比でプロットすると各サイズの曲線が  $T_c$  上の一点で交わる。ここで、横軸  $L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)$  として適当な  $\nu$  の値でプロットすると、一つの曲線上に各サイズの曲線が乗る  $\nu$  の値がある。このことにより  $\nu$  の値を決定する。 $\nu$  は無限系の臨界指数であり、本来大きなシステムサイズでなければ求めることは難しい。しかしこういった方法で値が求められれば無限系の研究に役立つことが期待される。

## 3 章 計算結果

### 3.1 Ising モデルにおける計算結果

#### (i) メトロポリス法による計算結果

Ising モデルの系において、 $16 \times 16, 24 \times 24, 32 \times 32, 48 \times 48, 64 \times 64$  の 5 通りの格子サイズの有限系のシミュレーションした。メトロポリス法を用いて、比熱、エネルギーの温度依存性を求めた。また磁化の 2 次モーメント  $\langle m^2(L) \rangle$  と 4 次モーメント  $\langle m^4(L) \rangle$  を用いて binder 比を求め有限サイズスケーリングを行った。

(1) 1 章に記載のメトロポリス法を用いて、システムサイズ  $L=16, 24, 32, 48, 64$  について空回し回数 2000 回、測定回数 1000000 回で比熱の温度依存性、binder 比を求め有限サイズスケーリングを行った。

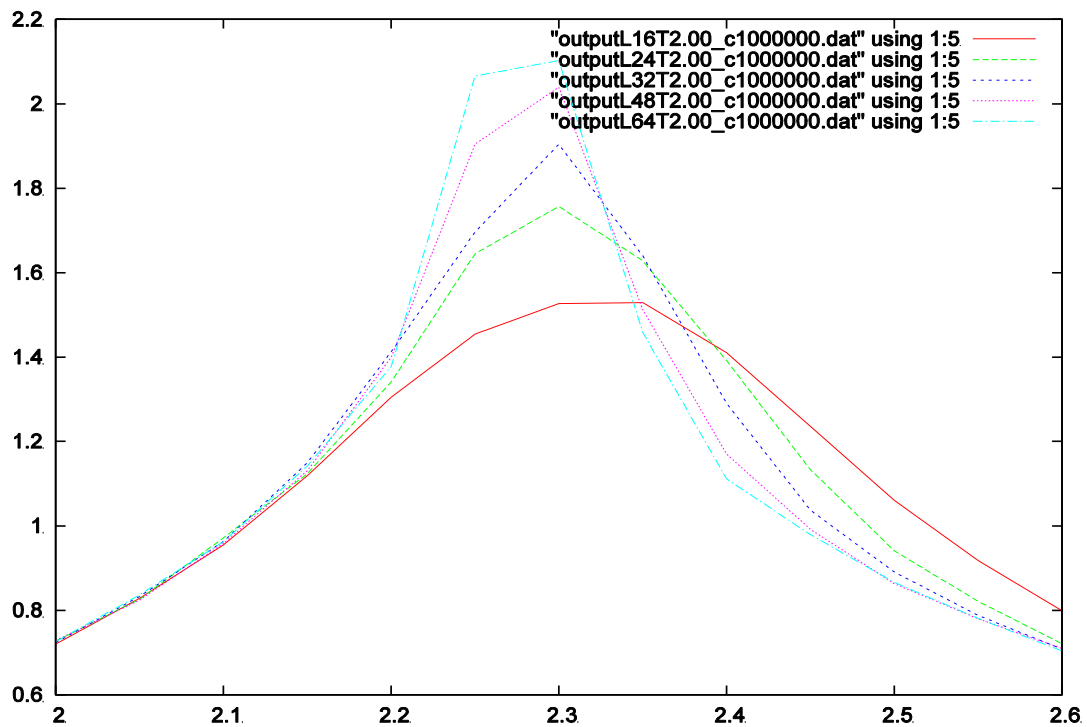


図 3.1.1 比熱の温度依存性(カウント 100 万回)

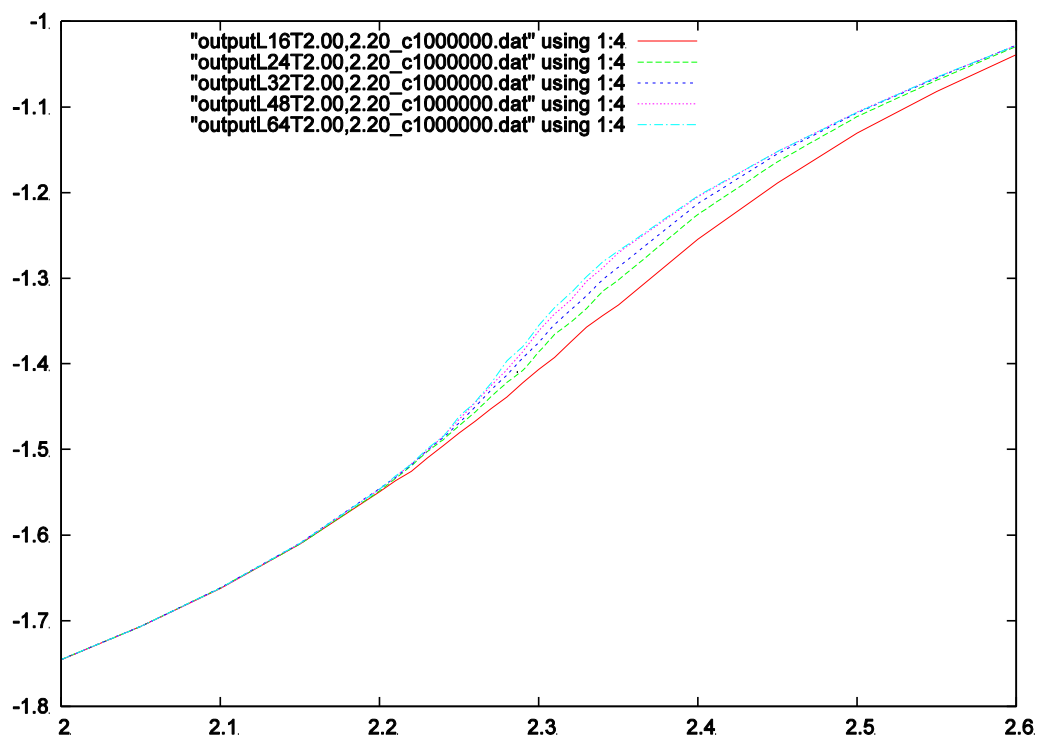


図 3.1.2 全エネルギーの温度依存性(カウント 100 万回)

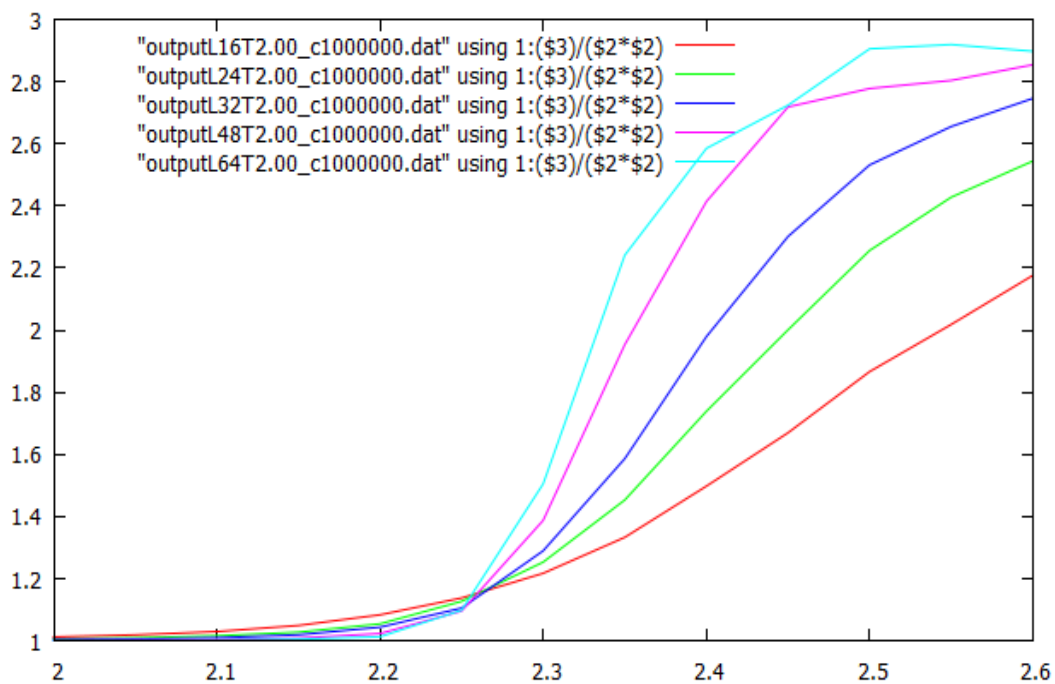


図 3.1.3 Binder 比(カウント 100 万回)

図 3.1.1, 図 3.1.2 のグラフより、転移点  $T_c=2.269$  であるということが分かる。図 3.1.3 のグラフは binder 比のプロットである。binder 比のプロットは横軸温度、縦軸  $\langle m^4(L) \rangle / \langle m^2(L) \rangle$  としてプロットを行っている。各システムサイズがある一点で交わっていると見ることができ、全ての曲線が一点で交わる場所の温度を  $T=T_c$  とすると、 $T_c=2.269$  と分かる。次にこの  $T_c=2.269$  を用いて、有限サイズスケーリングを行った。横軸  $L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)$  として、この  $\nu$  に適当な値を入れて、各システムサイズのプロットが 1 つの曲線に乗る  $\nu$  を探した。 $\nu=1$  とすると異なるシステムサイズの曲線が一つの曲線上に乗ることを確認することができた。その結果が図 3.1.4 である。それぞれのシステムサイズのプロットが 1 つの曲線に乗ったためイジングモデルでは 2 次転移が見られることが分かった。

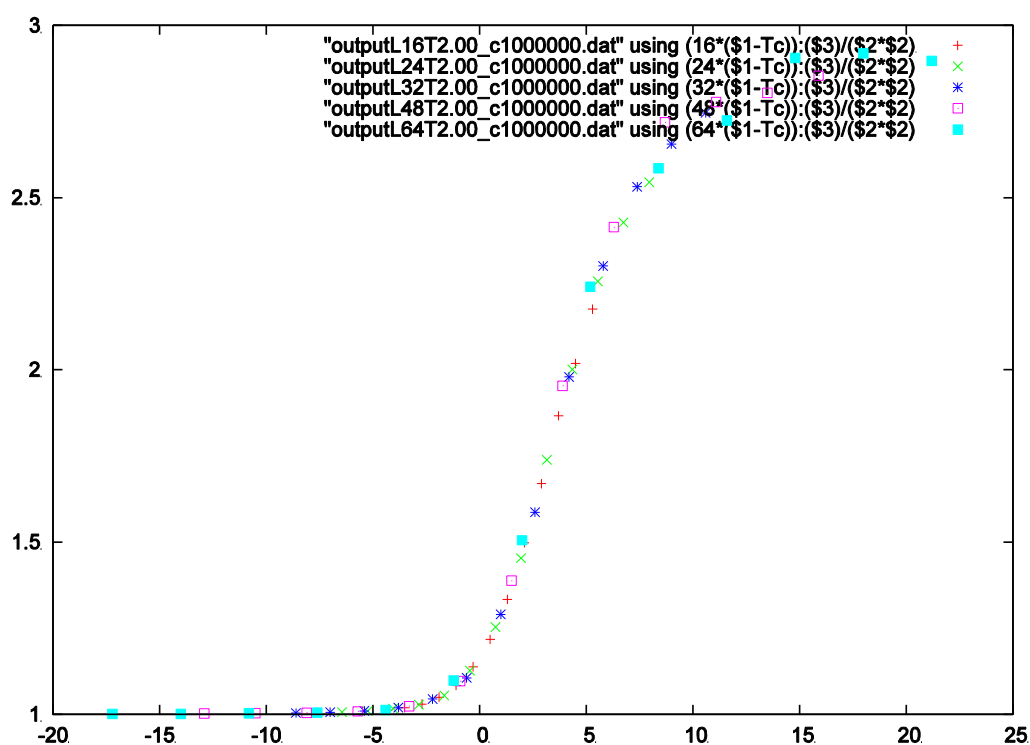


図 3.1.4 有限サイズスケーリング (カウント 100 万回)

## (ii)Wang-Landau 法による計算結果

続いて Wang-Landau 法を用いてエネルギー状態密度をもとめて、それを用いて比熱、全エネルギーの温度依存性を計算した。

繰り返しの回数  $i=24$  回でイジングモデルにおける状態密度  $g(E)$  を計算し、それを用いて比熱とエネルギーの温度依存性を計算した。図 3.1.5 は Wang-Landau 法で計算した状態密度の対数とエネルギーのグラフである。

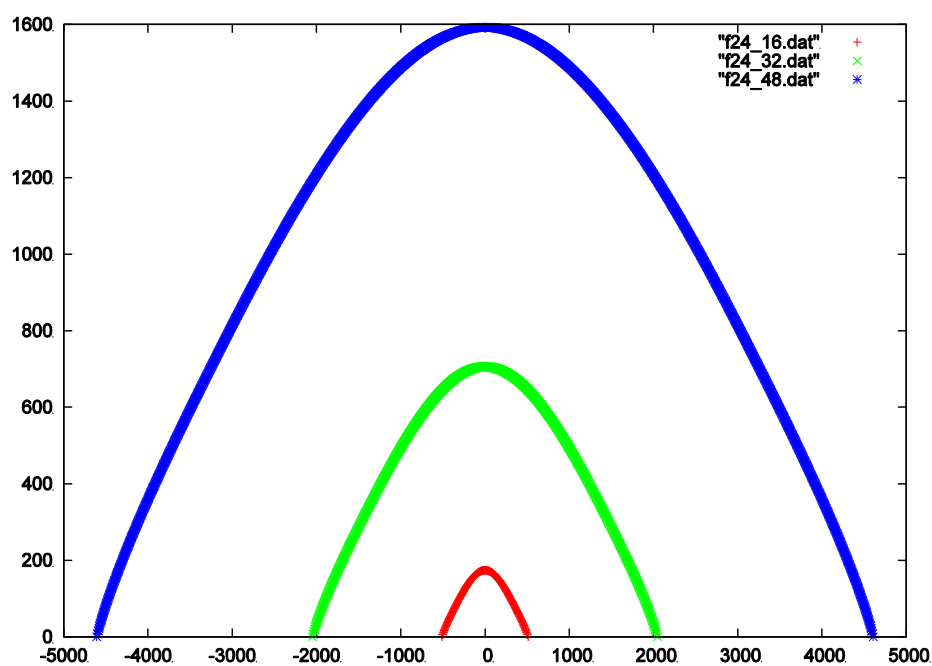


図 3.1.5 状態密度の対数とエネルギー

図 3.1.5 の状態密度  $g(E)$  を用いて、比熱と全エネルギーの温度依存性を計算した結果が次の図 3.1.6, 図 3.1.7 である。



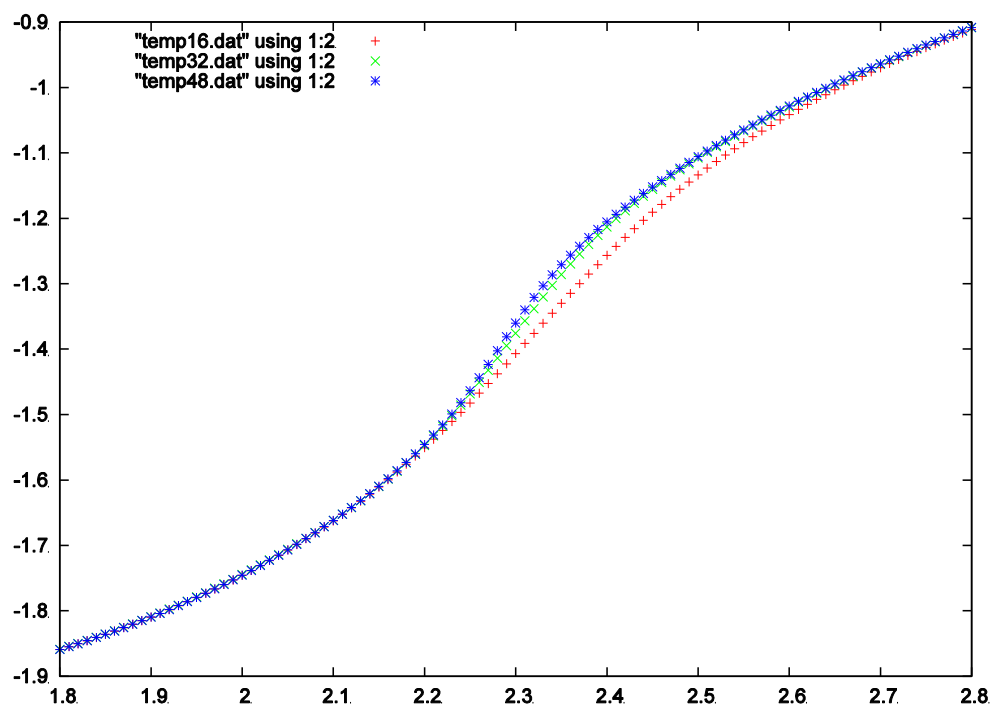


図 3.1.6 エネルギーの温度依存性

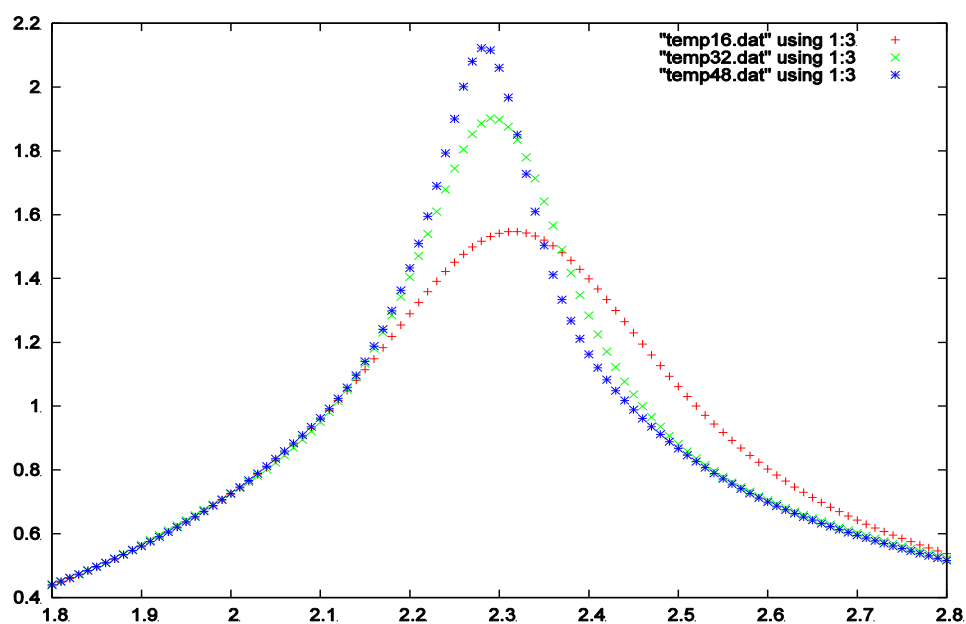


図 3.1.7 比熱の温度依存性

図 3.1.6, 図 3.1.7 と図 3.1.1, 図 3.1.2 のグラフを比較すると Wang-Landau 法による計算結果はメトロポリス法の結果に近い値となることが分かった。Wang-Landau 法とメトロポリス法の 2 つの方法で求めた結果が近くなったので両方法ともおおそ正しい計算ができていると思われる。

## 3.2 3DLL モデルにおける計算結果

### (i) メトロポリス法による計算結果

まず、メトロポリス法により、3DLL モデルの熱力学性質を調べた。境界条件として周期的境界条件をとり、また、初期状態としては、秩序相（すなわち、すべての分子の長軸がそろった状態）から始める。回転子のフリップについては、ランダム方向の回転子（半径 1 の球面）で試行状態として選び、フリップ後のエネルギー差  $\Delta E$  から、イジングモデルの時と同様のボルツマン重みの条件で、フリップさせた。なお、単純立方格子であるので、最近接格子点として 6 点ある。

メトロポリス法を用いて、3DLL モデルの全エネルギー、比熱の温度依存性を測定した結果を図 3.2.1, 図 3.2.2 に示す。システムサイズは  $L=6,8,12$  で、測定回数 10,000 で計算を行った。

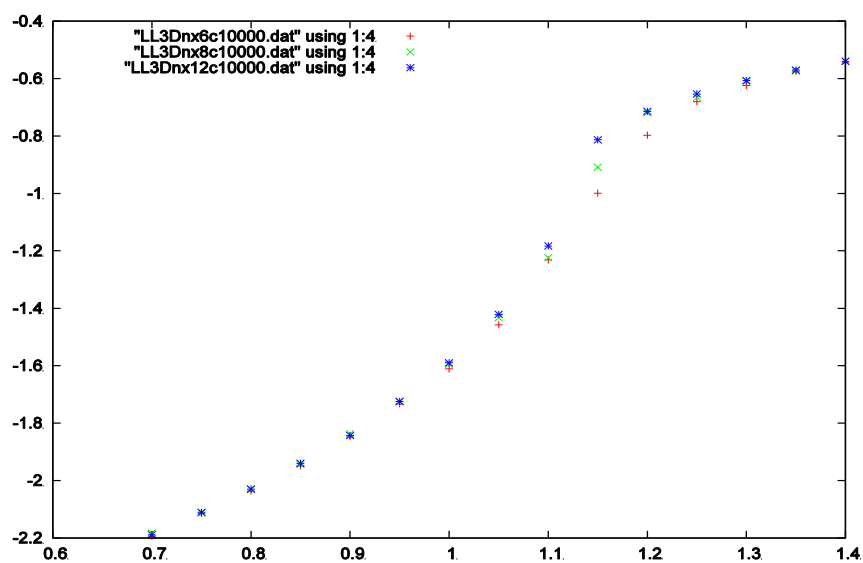


図 3.2.1 3D LL モデルのエネルギーの温度依存性

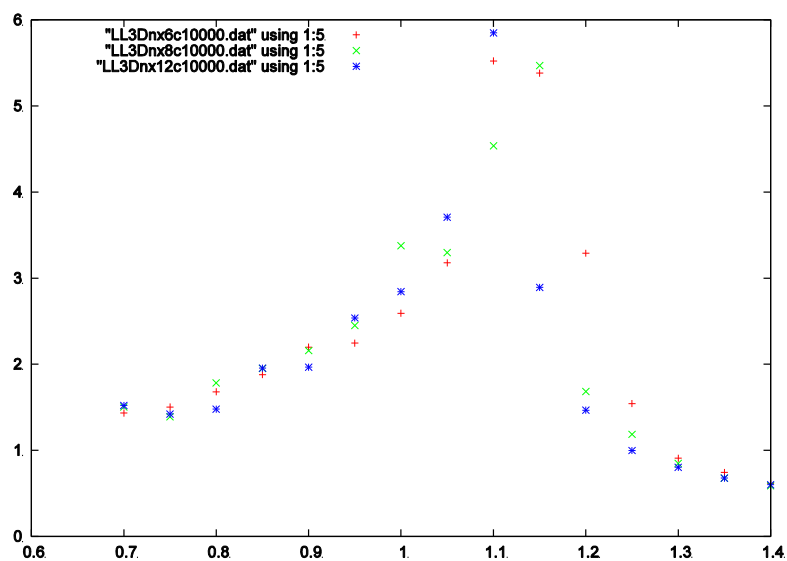


図 3.2.2 3D LL モデルの比熱の温度依存性

また、オーダーパラメータの温度依存性を図 2.2.3 に示す。

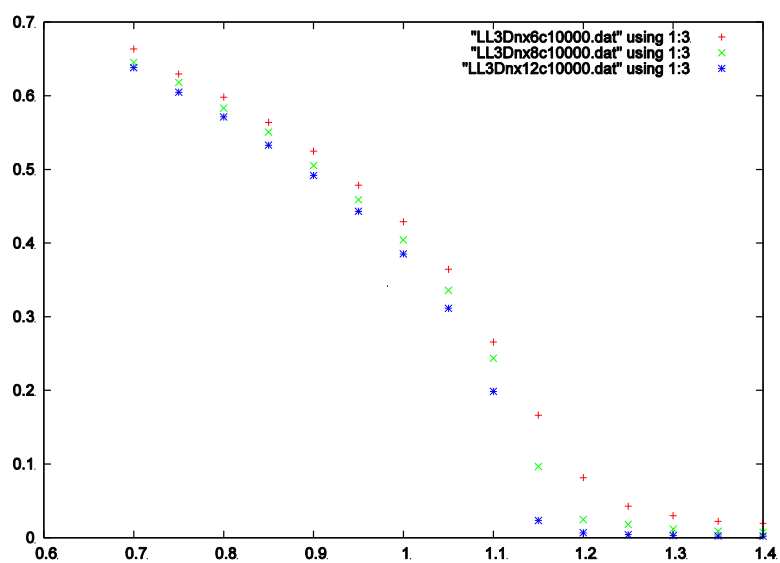


図 3.2.3 3DLL モデルのオーダーパラメータの温度依存性

図 3.2.1～3.2.3 から、おおよそ  $T=1.12$  付近で転移が起きていることが分かる。そこで  $T=1.12$  近傍のデータを、より測定回数を増やして測定する。

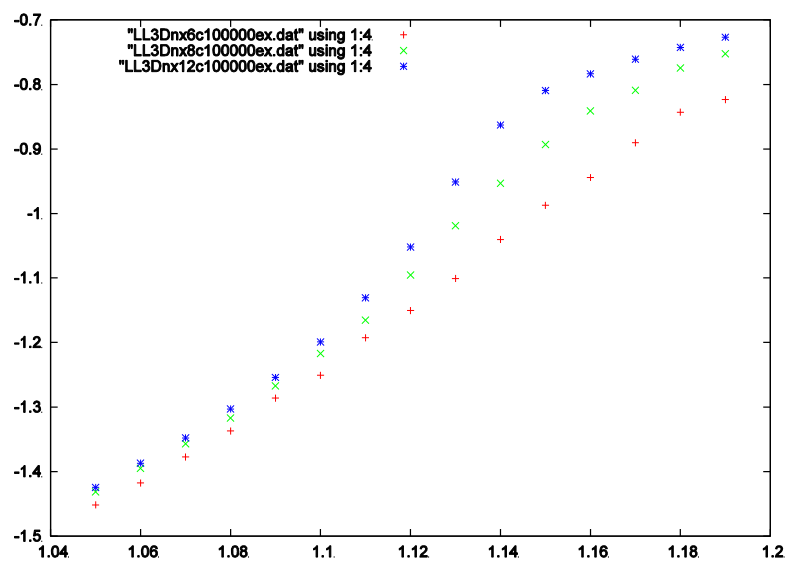


図 3.2.4 3DLL モデルのエネルギーの温度依存性（転移点近傍）

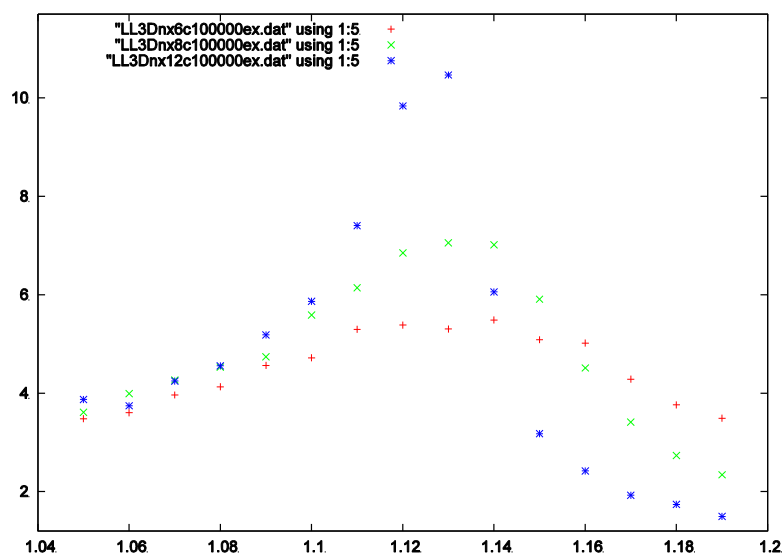


図 3.2.5 3DLL モデルの比熱の温度依存性（転移点近傍）

測定回数 100,000 回、 $T=1.05\sim 1.17$  で全エネルギー、比熱の測定を行ったのが、図 3.2.4, 3.2.5 である。

## (ii)Wang-Landau 法による計算結果

3DLL モデルの相転移の次数が 1 次であるか 2 次であるか判定するために、Wang-Landau 法を用いて議論する。そのために Komura-Okabe[7]に従い、状態密度の差分  $\Delta \ln g(E)$  のエネルギー依存性を計算し、プロットした。ここで、

$$\Delta \ln g(E) = \ln g(E + \Delta E) - \ln g(E)$$

で、 $g(E)$  はエネルギー状態密度である。

システムサイズ  $L=4,8,12$  において Wang-Landau 法の iteration の回数を  $i=24$  回として計算した結果が図 3.2.6 である。縦軸は  $\Delta \ln g(E)$  であり、横軸は 1 粒子あたりのエネルギーである。

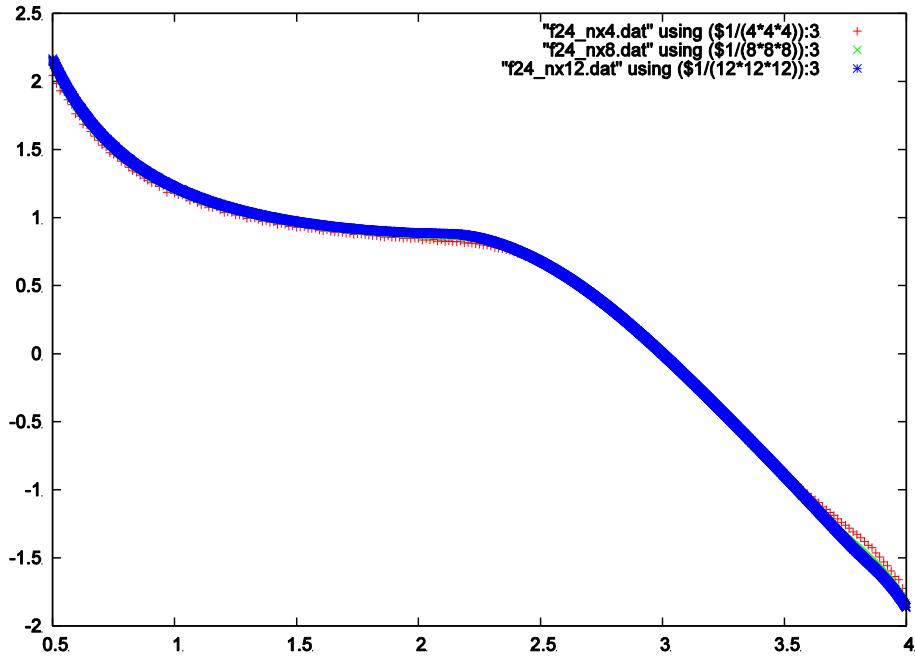


図 3.2.6  $L=4,8,12$  の状態密度の差分のエネルギー依存性

図 3.2.6 では小さいサイズに対して広いエネルギー範囲に対して、 $\Delta \ln g(E)$  を調べたのが、相転移近傍のエネルギー 1.8~2.2 に絞ってシステムサイズ  $L=16$  の場合を示したのが図 3.2.7 である。ただし、iteration の回数は  $i=22$  である。また図 3.2.8 に  $i=16,18,20,22$  の状態密度の差分の収束の様子を示してある。

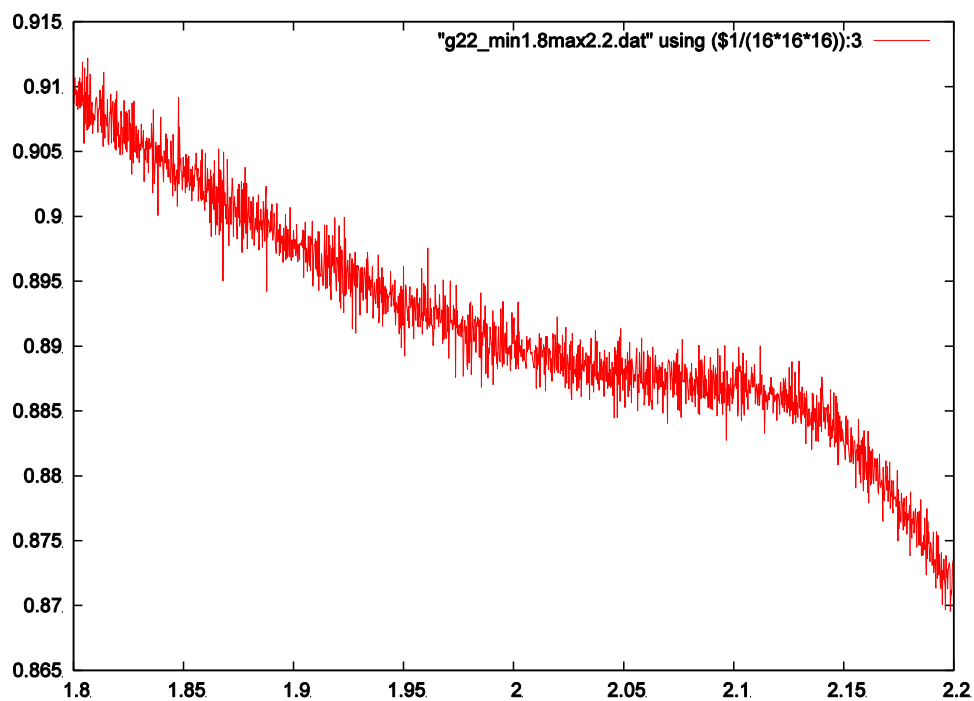


図 3.2.7  $L=16, i=22$  における状態密度の差分のエネルギー依存性

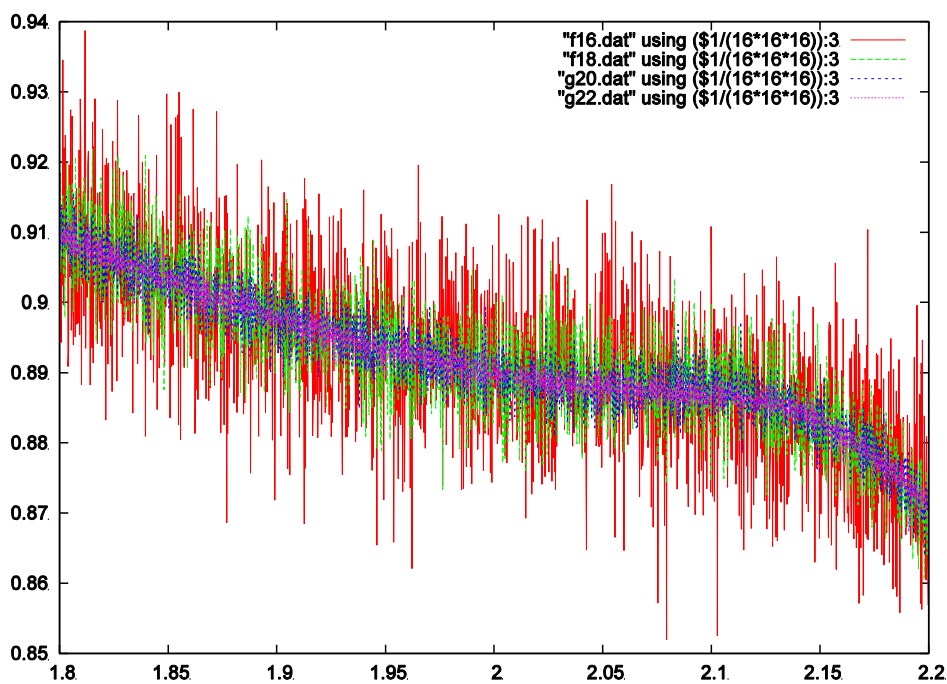


図 3.2.8  $L=16$  における状態密度の差分の収束の様子

Iteration を繰り返すことで、状態密度の差分値が収束していくのが分かる。 $i=22$  において、誤差をなくすため乱数の種を変えた計算を複数回行い平均を取ったものが図 3.2.9 である。図 3.2.7 と同じ  $L=16, i=22$  の場合であるが、4 回の測定の平均を取ってある。また、さらに  $\Delta \ln g(E-2\Delta E), \Delta \ln g(E-\Delta E), \Delta \ln g(E), \Delta \ln g(E+\Delta E), \Delta \ln g(E+2\Delta E)$  のデ

ータを用いてスムージングをとったものが図 2.2.10 である。

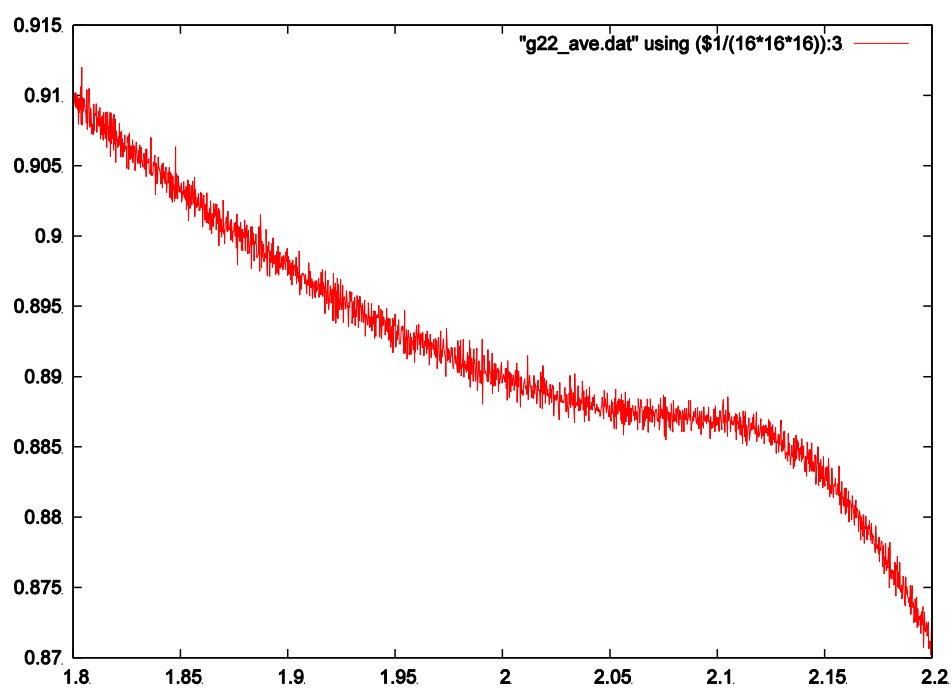


図 3.2.9  $L=16$  における 4 回のデータの平均

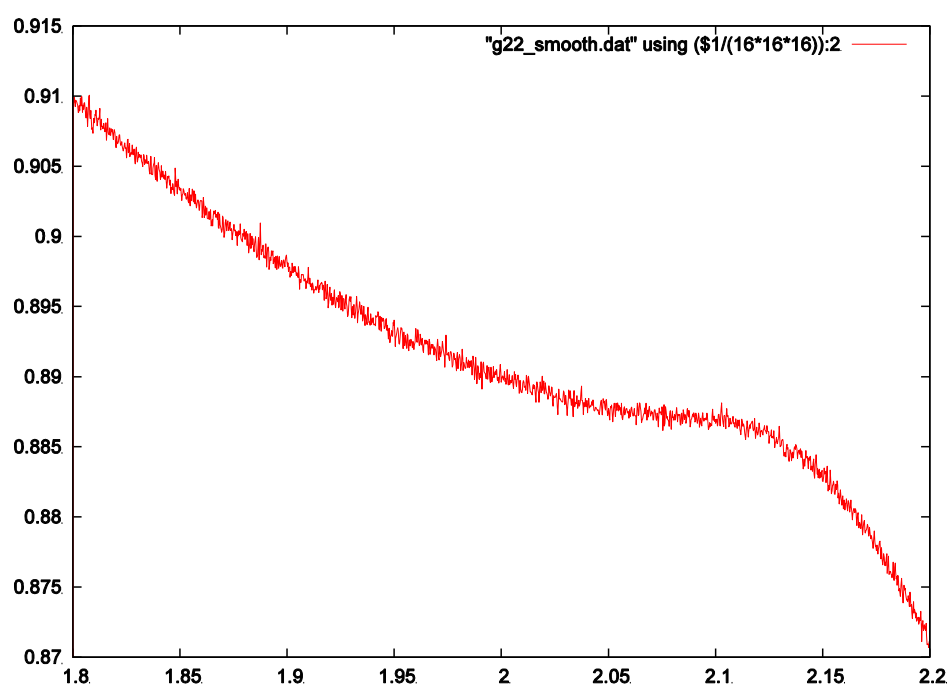


図 3.2.10 図 3.2.9 にスムージングを施したグラフ

E=1.80~2.20 と比較的広いエネルギー範囲について、L=16,24,32 に対して 4 回の平均を取り、スムージングを施した結果が図 3.2.11 である。

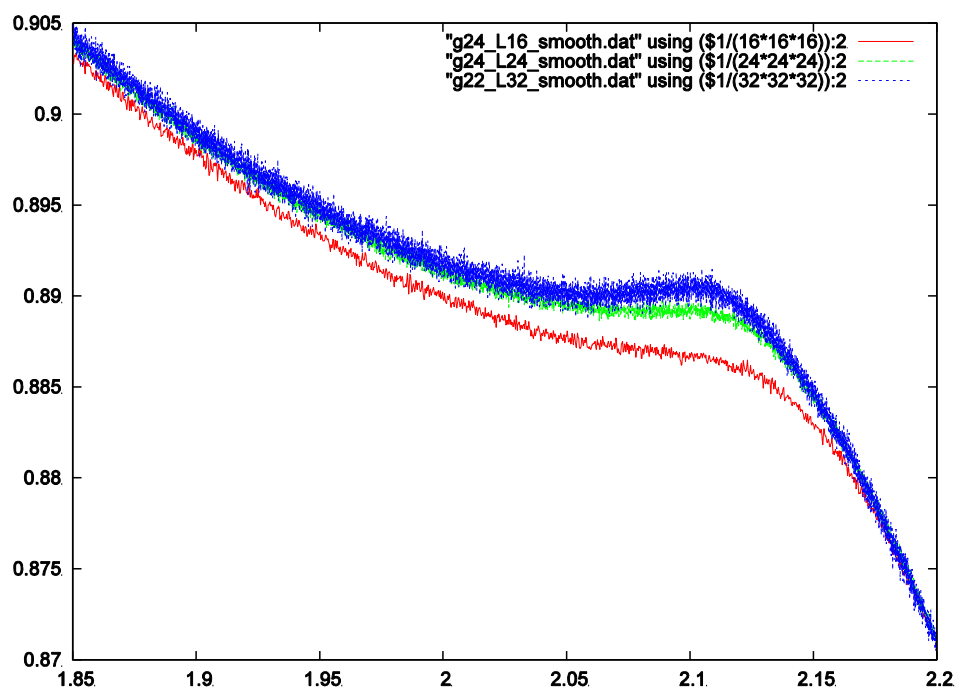


図 3.2.11 L=16,24,32 の比較

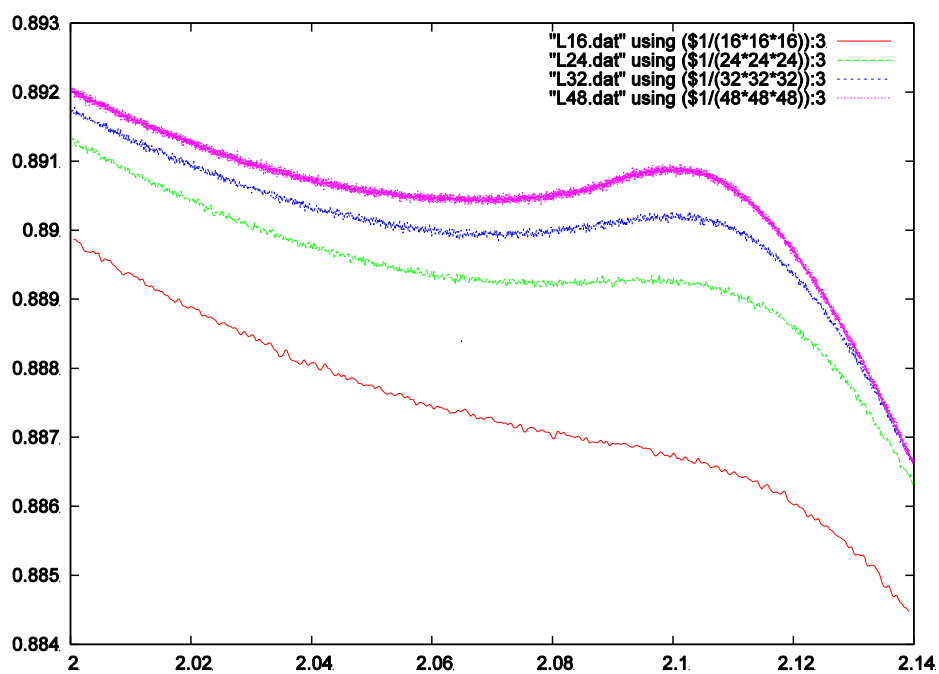


図 3.2.12 L16-48, i=28 での状態密度の差分



エネルギー範囲を 2.0~2.14 に絞り、サイズを  $L=48$  の測定を精密に行ったものが、図 3.2.12 である。Iteration は  $i=28$  まで行い、また 8 サンプルの平均にスムージング操作を施してある。このことにより、より収束したきれいなグラフをプロットすることが実現できた。図 3.2.12 によると、系のサイズを大きくすると、1 次転移の特徴的なふるまいである S 字構造が顕著になり、この系の相転移が 1 次転移であることを明瞭に示すことができた。図 2.3.2 に示すように、1 次転移の転移温度は、 $\Delta \ln g(E)$  の S 字構造の等面積則で決まる  $\beta_c$  で与えられる。有限系では、有限サイズ効果のために、その  $\beta_c$  はサイズに依存し、 $\beta_c(L)$  と書くことにする。1 次転移に対する有限サイズスケーリングの議論 [8] によれば、 $\beta_c(L)$  のサイズ依存性は

$$\beta_c(L) = \beta_c + a/L^d$$

となる。ここで、 $\beta_c$  は無限系の 1 次転移温度、また、 $d$  は空間次元である。今の場合、3 次元系であるので、 $d=3$  である。

図 3.2.12 で、S 字構造が顕著になる  $L=32$  と  $L=48$  の  $\beta_c$  を等面積則により推定すると、

$$\beta_c(32) = 0.8900$$

$$\beta_c(48) = 0.8907$$

となる。 $\beta_c(L)$  を  $1/L^3$  に対してプロットしたものが、図 3.2.13 で、この  $1/L^3 \rightarrow 0$  の外挿値から、 $\beta_c$  が推定でき、

$$\beta_c = 0.8910$$

となる。以前のモンテカルロ法を用いた、1 次転移温度の推定値として、

$$\beta_c = 0.8879 \text{ (1986) [9]}$$

$$\beta_c = 0.8909 \text{ (2001) [10]}$$

という値があるが、本研究の結果は、[9]の値を排除するもので、[10]の値と誤差範囲で一致する。

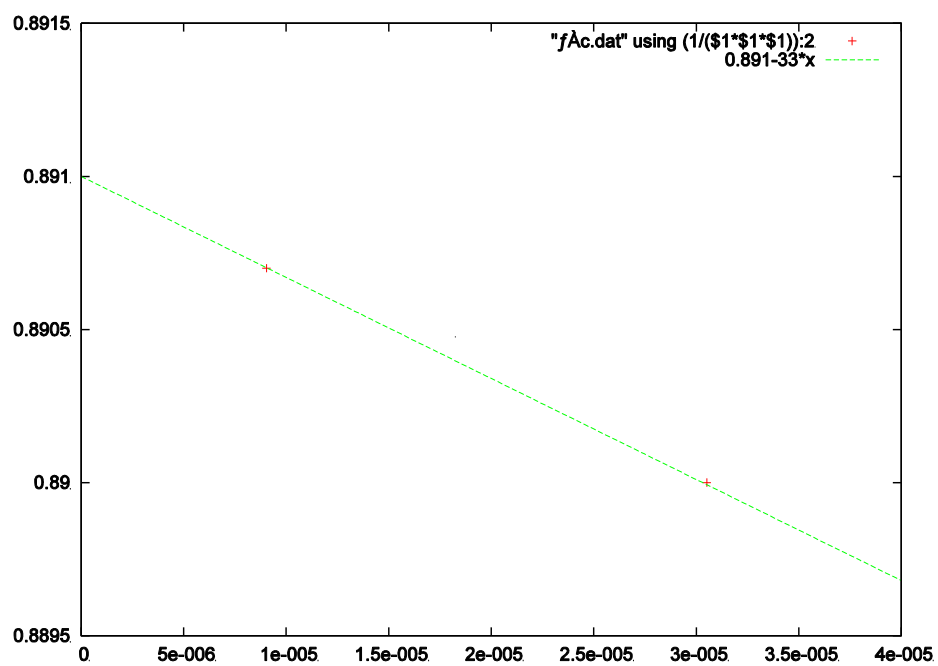


図 3.2.13 3DLL モデルの 1 次転移温度の  $\beta_c(L)$  依存性。  $1/L^3$  に対してプロットしてある。図中の直線により、外挿値  $\beta_c$  を推定している。

## 4 章 終章

### 4.1 まとめ

2次元イジングモデルと2次元 Lebwohl-Lasher モデルにおいて、メトロポリス法、Wang-Landau 法を用いてシミュレーションを行った。2次元イジングモデルにおいては、メトロポリス法で比熱、全エネルギーの温度依存性を計算し、Wang-Landau 法で計算したものとほぼ同じ結果になったのを確認でき 2つの方法が正しい結果を計算できていることを確認できた。また有限サイズスケーリングを行い、Ising モデルが2次転移を示すことの証明、臨界指数の決定を行うことができた。

3DLL モデルにおいて、メトロポリス法で比熱、全エネルギーの温度依存性を計算した。Wang-Landau 法で状態密度の差分を計算し、エネルギーを変数にプロットした。S字構造がサイズを大きくするほど顕著になっていくのが分かり、1次転移を確認できた。また転移温度をおよそ  $T_c=0.8910$  と求めることができた。

### 4.2 今後の展望

3DLL モデルにおける、Wang-Landau 状態密度の差分の計算について  $L=64$  以上のより大きなサイズ、もしくは  $L=48$  と  $32$  の間のサイズ例えば  $L=40$  などについて計算する。そのことによりサイズの系統性や、転移温度の見積もりがより正確になると考えられる。

### 4.3 参考文献

- [1] F. Wang and D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001).
- [2] P. A. Lebwohl and G. Lasher, Phys. Rev. A 6, 426 (1972).
- [3] U. Fabbri and C. Zannoni, Mol. Phys. 58, 763 (1986).
- [4] N.V. Priezjev and R.A. Pelcovits, Phys. Rev. E 63, 062702 (2001).
- [5] D. Jayasri, V.S.S. Sastry, and K.P.N. Murthy, Phys. Rev. E 72, 036702 (2005).
- [6] W. Maier and A. Saupe, Z. Naturforsch. A 13, 564 (1958); 14, 882 (1959).
- [7] Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E 85, 010102(R) (2012).
- [8] 例えば、K. Binder, in "The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics" ed. K. Binder, pp 1-22, Springer, 1992.
- [9] U. Fabbri and C. Zannoni, Mol. Phys. 58, 763-788 (1986).
- [10] N. V. Priezjev and R. A. Pelcovits, Phys. Rev. E 63, 062702 (2001)

また全体的に、下記の論文を参考にした。

[1]卒業論文 小村幸治(2008)

[2]修士論文 小村幸治(2010)

[3]卒業論文 安田健(2006)

[4]Monte Carlo Simulations of Spin Systems Wolfhard Janke(1996)

[5]統計力学 岡部豊(2006)

#### 4.4 謝辞

本研究を行うにあたって、岡部豊教授をはじめとする量子凝縮系研究室の教授方に大変お世話になりました。心から深く感謝を申し上げます。